

Étude de la thermogravitation dans une couche fluide horizontale

Bilal Elhajjar^a, Abdelkader Mojtabi^a, Manuel Marcoux^a, Marie-Catherine Charrier-Mojtabi^b

^a IMFT, UMR CNRS/INP/UPS n°5502, UFR MIG, Université Paul Sabatier,
118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex, France

^b Laboratoire d'Energétique (LESETH), EA 810, UFR PCA, Université Paul Sabatier,
118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex, France

Résumé

Nous présentons une étude analytique et numérique de l'action conjuguée de la thermodiffusion et de la convection, dite diffusion thermogravitationnelle, dans les mélanges binaires. Il s'agit de quantifier l'importance de la séparation dans le cas d'une cavité parallélépipédique horizontale remplie d'un mélange binaire et soumise à des gradients horizontaux de température constants sur les deux parois horizontales, les autres parois sont imperméables à la matière et thermiquement isolées. Cette nouvelle procédure diffère de celle habituellement utilisée et qui consiste à obtenir la séparation thermogravitationnelle dans une cellule verticale dont deux parois verticales sont maintenues à des températures constantes et différentes.

Abstract

Study of the thermogravitation in a horizontal fluid layer. We propose an analytical and numerical study of the combined action of the thermodiffusion and the convection in a binary mixture. The combination of these two phenomena is called the thermogravitational diffusion. We are interested in quantifying the separation in a horizontal parallelepipedic cavity filled with a binary mixture and subjected to a constant horizontal temperature gradient on the two horizontal walls, the other walls being thermally insulated and impermeable. This new procedure is different from the classical one where the cavity is vertical and differentially heated on the two vertical walls.

Mots-clés : Convection; Thermodiffusion; Thermogravitation; Effet Soret; Mélanges binaires ; Séparation

Keywords : Convection; Thermodiffusion; Thermogravitation; Soret effect; Binary mixtures; Separation

Abridged English version

Thermodiffusion is a physical process occurring when a thermal gradient is applied to a fluid mixture. The concentration gradient is created by the temperature field; the mass flux is given by [1]:

$$\vec{J}_m = -\rho D \vec{\nabla} C - \rho C(1-C) D_T \vec{\nabla} T$$

Where D is the coefficient of mass diffusion, D_T the coefficient of thermodiffusion, ρ the density, and C the mass fraction of the denser component.

The thermogravitational diffusion is the combination of two phenomena: the convection and the thermal diffusion. The coupling of these two phenomena leads to species separation.

Thermogravitational technique consists usually in vertical [2] or tilted cavity [6] bounded by two rigid differentially heated vertical walls and adiabatic horizontal walls, and filled by a binary fluid or by a homogeneous isotropic porous medium saturated by a two-component fluid [3].

In the present work, we propose a new procedure coupling the convection and the thermodiffusion, to obtain a greater separation compared to the procedures already used. This approach permits us to obtain thermogravitational diffusion in a horizontal box heated from above. On the other hand we impose a constant temperature gradient, according to the horizontal axis x on each of the two horizontal walls of the box, which generates an unicellular convective flow similar to that produced in the vertical cell differentially heated on the vertical walls. The advantage of this new procedure is that we can better control the coupling between convection and thermodiffusion. With this new approach we have two external parameters of control, the constant temperature gradient, b , imposed on the horizontal plates which favors the convective flow and the temperature difference $\Delta T = T_H(x) - T_B(x)$ between the hot wall at $T_H(x)$ and the cold wall at $T_B(x)$ which controls the thermodiffusion separation. The two vertical walls are adiabatic. We restrict our work to the two dimensional study.

By using the Boussinesq approximation, the equations of conservation of mass, energy, momentum and species for the binary mixture are given by the system of equations (1-4). The associated boundary conditions are given by (5-9).

We solved this problem analytically and numerically using MAPLE and the FEMLAB code respectively.

We have obtained some results different from those obtained in the case of the vertical cavity. In the case of the vertical cavity [2], the velocity is independent of the separation. In our problem we have found that the velocity depends on separation distribution. If the coefficient of thermodiffusion is positive the velocity decreases when the separation increases and if the coefficient of thermodiffusion is negative the velocity increases with the separation.

We have studied the variation of separation according to the temperature gradient b for imposed values of the temperature difference between the two horizontal walls (Fig.1). It was found that there is a maximum of separation for an optimal value of the horizontal temperature gradient. This maximum corresponds to the optimal coupling between convection and thermodiffusion. The maximum value of b increases when ΔT increases. We numerically dealt with the problem of thermogravitation in a cavity of 2 mm thickness and 200 mm length, with a temperature difference of 1K, for a water ethanol mixture (Table 1), and we have found a good agreement with the analytical results (Fig. 2). Fig. 3 shows the evolution of the concentration field with b in a cavity of 2 mm thickness and 20 mm length: for this case the optimal separation is obtained for $b = 40 \text{ Km}^{-1}$.

To conclude, the originality of this work lies in choosing a different geometry and thermal boundaries conditions instead of the classical ones used previously (i.e.: a vertical cavity, differentially heated). This geometry has the advantage that we may produce more solute in comparison with vertical cavity; indeed the optimum separation in our case corresponds to a higher thickness, $H=2\text{mm}$, than the one obtained for vertical cavity $H=0.2\text{mm}$.

1. Introduction

La thermodiffusion est un phénomène physique qui apparaît lorsqu'un fluide multiconstituant est soumis à un gradient de température. En effet le gradient thermique induit un flux de matière dû à l'effet Soret. Dans un

mélange de fluide binaire, le vecteur densité de flux de matière \vec{J}_m d'un des constituants, de fraction massique C , résulte de la contribution non seulement du gradient de concentration mais également du gradient de la température [1]:

$$\vec{J}_m = -\rho D \vec{\nabla} C - \rho C(1-C) D_T \vec{\nabla} T$$

D désigne le coefficient de diffusion massique, D_T le coefficient de thermodiffusion et ρ la masse volumique. La combinaison de la convection et de la thermodiffusion est appelée diffusion thermogravitationnelle, cette technique est utilisée pour la séparation des espèces dans les mélanges.

Ce sont Furry, Jones et Onsager qui les premiers, ont développé en 1939 [2], la théorie de la thermodiffusion pour interpréter les processus expérimentaux de séparation d'isotopes. Ils ont écrit les équations de bilan permettant de décrire le processus de diffusion thermogravitationnelle pour un mélange gazeux binaire dans une cavité parallélépipédique verticale de grand rapport d'aspect, différentiellement chauffée sur deux parois verticales

Ils ont trouvé les conditions optimales de séparation et ils ont obtenu une séparation maximale pour des cavités très étroites et de très grand rapport d'aspect. Emery et Lorenz ont développé en 1963 [3], sur les mêmes bases que Furry, Jones et Onsager une solution analytique du problème de la diffusion thermogravitationnelle en milieu poreux. Jamet et al. [4] puis Marcoux et Charrier-Mojtabi [5] ont développé des simulations numériques et comparé leurs résultats avec les résultats analytiques pour une cellule de thermogravitation verticale en milieu poreux. Platten et al. en 2003 [6] ont démontré, qu'en inclinant une colonne de thermogravitation, remplie d'un fluide binaire, d'un certain angle par rapport à la verticale, la séparation moléculaire augmente.

On propose dans ce travail une nouvelle procédure mettant en jeu un couplage entre la convection et la thermodiffusion visant à assurer une plus grande séparation par rapport au cas classique des cellules de thermogravitation verticales utilisées initialement dans les travaux de Furry et al. [2]. Nous allons pour cela nous intéresser au problème de la diffusion thermogravitationnelle dans une cavité parallélépipédique horizontale chauffée par le haut pour éviter les mouvements convectifs multicellulaires. On impose un gradient de température constant, selon l'axe horizontal x , sur chacune des deux parois horizontales de la cavité ce qui génère un mouvement convectif unicellulaire semblable à celui observé dans la cellule verticale différentiellement chauffée. L'avantage de cette nouvelle approche est de mieux maîtriser le couplage convection-thermodiffusion. En effet dans la situation classique on ne dispose que d'un seul paramètre extérieur de contrôle à savoir la différence de températures ΔT entre les 2 parois verticales isothermes. Cette différence de température induit non seulement l'importance du mouvement convectif dans le champ de la pesanteur mais également l'importance de la thermodiffusion entre les deux plaques isothermes maintenues respectivement à T_1 et T_2 avec $\Delta T = T_1 - T_2$. Avec la nouvelle approche, on dispose de deux paramètres extérieurs de contrôle, le gradient de température constant imposé aux plaques horizontales qui induit l'importance de la vitesse de la boucle convective et la différence de température $\Delta T = T_H(x) - T_B(x)$ entre la paroi chaude du haut à $T_H(x)$ et la paroi froide du bas à $T_B(x)$ qui contrôle l'importance de la thermodiffusion. Les deux parois verticales sont supposées adiabatiques.

On restreint notre travail à l'étude bidimensionnelle avec $o\vec{z}$ comme axe vertical et $o\vec{x}$ comme axe horizontal.

2. Formulation mathématique

Ce problème admet une solution stationnaire que l'on écrit sous la forme :

$$T = T(x, z); C = C(x, z); \vec{V} = U(x, z) \vec{e}_x + W(x, z) \vec{e}_z$$

Où T , C et (U, W) désignent respectivement la température, la fraction massique du constituant le plus dense et les deux composantes horizontale et verticale de la vitesse.

On admet que la masse volumique du fluide binaire remplissant la cavité rectangulaire s'écrit sous la forme : $\rho = \rho_0 [1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_C(C - C_0)]$ où ρ_0 désigne la masse volumique à l'état défini par la température de référence T_0 et la concentration de référence C_0 , β_T et β_C désignent respectivement les coefficients d'expansion thermique et massique : ($\beta_T = -(1/\rho_0)(\partial\rho/\partial T)_C > 0$, $\beta_C = -(1/\rho_0)(\partial\rho/\partial C)_T < 0$).

Dans ces conditions, en se plaçant dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, les équations de continuité, de conservation de la quantité du mouvement, de l'énergie et des espèces chimiques, prenant en compte l'effet Soret, s'écrivent :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (1)$$

$$\rho_0 \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} \right] = -\vec{\nabla} P + \rho_0 [1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_c (C - C_0)] (-g) \vec{e}_z + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T = a \nabla^2 T \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} C = D \nabla^2 C + D_T C (1 - C) \nabla^2 T \quad (4)$$

Où μ est la viscosité dynamique, a la diffusivité thermique, D le coefficient de diffusion massique et D_T le coefficient de thermodiffusion.

On suppose que le produit $C(1-C)$ présent dans l'équation (4) varie peu pour qu'on puisse remplacer ce produit par le produit des concentrations à l'état initial $C_0(1-C_0)$.

Les conditions aux limites associées sont :

$$T_B = T_F - bx \quad \text{Pour } z=0 \quad (5)$$

$$T_H = T_C - bx \quad \text{Pour } z=H \quad (6)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{Pour } x=0, L, \forall z \quad (7)$$

$$\vec{V} = 0 \quad \forall x \text{ pour } z=0, H \text{ et } \forall z \text{ pour } x=0, L \quad (8)$$

$$(D\vec{\nabla}C + D_T C_0 (1 - C_0) \vec{\nabla}T) \cdot \vec{n} = 0 \quad \forall x \text{ pour } z=0, H \text{ et } \forall z \text{ pour } x=0, L \quad (9)$$

Où b est le gradient horizontal de température imposé sur les deux parois horizontales et \vec{n} est la normale extérieure à chaque paroi.

3. Résolution analytique

La résolution analytique du problème nécessite le recours à de nombreuses hypothèses permettant de simplifier le formalisme mathématique du problème. Certaines hypothèses ont déjà été utilisées par Furry, Jones et Onsager lors de la résolution du problème de la séparation des espèces dans une cellule verticale [2], et d'autres hypothèses sont propres à notre problème de séparation des espèces en couche horizontale.

Les principales hypothèses utilisées sont les suivantes :

Pour une cellule de grand rapport d'aspect L/H , On utilise l'hypothèse d'écoulement parallèle donc :

$$\vec{V} = U(z) \vec{e}_x, \quad T(x, z) = -bx + T_2(z), \quad C = kx + C_2(z).$$

Compte tenu de l'ensemble de ces hypothèses et en éliminant la pression du système d'équations (1-4) on obtient:

$$v \frac{d^3 U}{dz^3} = -g\beta_T b + g\beta_c k \quad (10)$$

$$-bU = a \frac{d^2 T_2}{dz^2} \quad (11)$$

$$Uk = D \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} \right) + D_T C_0 (1 - C_0) \frac{d^2 T_2}{dz^2} \quad (12)$$

Où v représente la viscosité cinématique du mélange.

On montre dans cette étude qu'il n'est pas possible de négliger le terme $g\beta_c k$, comme c'est le cas dans l'étude de la thermogravitation dans une cellule verticale : on parle alors «d'effet oublié». Pour la modélisation des écoulements dans la cavité horizontale, on se ramène à la résolution de trois équations différentielles, du troisième ordre pour la vitesse et du deuxième ordre pour la température et la concentration et on dispose de six conditions aux limites car les conditions aux limites sur les parois verticales ne sont pas utilisées puisque l'on ne tient pas compte de l'écoulement près des bords latéraux. Donc il faut disposer de conditions supplémentaires.

Nous utilisons la conservation du débit, à travers toute section verticale de la cellule. De plus à l'état stationnaire on a stabilisation du profil horizontal de concentration, donc il n'y a plus de flux net de masse à travers toute section verticale de la cellule. La cellule expérimentale étant fermée, donc on a également la conservation de la masse du soluté présent à l'état initial dans toute la cavité.

L'intégration du système d'équations (10-12) avec les conditions associées conduit au profil de vitesse, aux champs de température et de concentration et à l'évaluation de la constante k .

La séparation est définie comme la différence des fractions massiques entre les deux extrémités gauche et droite de la cellule et elle est donnée par l'expression suivante : $S = -kL$, où L est la longueur de la cellule.

4. Résultats analytiques

On cherche les conditions qui correspondent à une séparation maximale. Pour illustrer les résultats on considère le mélange binaire eau-éthanol déjà utilisé par Platten et al. [6]. Les caractéristiques de ce mélange sont données dans le tableau 1 et la cellule utilisée est de 53 cm de longueur.

ρ	β_T	β_c	D	D_T	ν	a
935.17 kg.m ⁻³	7.86 10 ⁻⁴ K ⁻¹	-0.212	4.32 10 ⁻¹⁰ m ² .s ⁻¹	1.37 10 ⁻¹² m ² .s ⁻¹ . K ⁻¹	2.716 10 ⁻⁶ m ² .s ⁻¹	10 ⁻⁷ m ² .s ⁻¹

Tableau I. Propriétés du mélange eau éthanol à 60.88 % en masse d'eau et à la température moyenne de 22.5 °C.
Table I. Properties of the mixture water (60.88 wt %)-ethanol (39.12 wt %) at a mean temperature of 22.5 °C.

4.1. Vitesse de l'écoulement

Le champ de vitesse est donné par : $u(z) = ((-g\beta_T b + g\beta_c k)(2z^3 - 3Hz^2 + H^2z))/12\nu$, donc le profil de vitesse est cubique et correspond au profil approprié pour permettre la séparation.

Le niveau élevé de température dans la partie gauche de la cellule conduit à une diminution de la masse volumique des particules fluides situées dans cette partie de la cellule, ces particules tendent donc à se déplacer vers le haut et à droite puisque les particules situées dans la partie droite de la cellule sont plus froides. Ainsi la boucle convective tourne dans le sens des aiguilles d'une montre. Suivant le signe du coefficient de thermodiffusion D_T , l'intensité de la vitesse peut soit augmenter soit diminuer avec la séparation. En effet, dans le cas où le coefficient de thermodiffusion est positif, le constituant le plus lourd (l'eau dans notre problème) migre vers la paroi la plus froide c'est-à-dire la paroi inférieure puis il est advecté par la boucle convective vers la partie gauche de la cellule. Ainsi, la fraction massique de l'eau et la masse volumique du mélange augmente dans cette partie de la cellule alors que ces deux grandeurs diminuent dans la partie droite. Par conséquent la différence de masse volumique entre les deux parties gauche et droite de la cellule diminue et par suite la vitesse de la boucle convective diminue avec la séparation.

Dans le cas où le coefficient de thermodiffusion est négatif, le constituant le plus lourd (i.e l'eau) se déplace vers la paroi la plus chaude c'est-à-dire la paroi supérieure. La boucle convective étant dans le sens des aiguilles d'une montre, elle advecte l'eau vers la partie droite de la cellule. Ce qui fait que la vitesse de la boucle convective augmente avec la séparation.

4.2. Etude de la séparation

La figure 1 montre la variation de la séparation en fonction du gradient horizontal de température b pour $H=2mm$ et pour différentes valeurs de ΔT .

Pour les différentes courbes il y a un maximum de séparation pour une valeur optimale du gradient horizontal de température. Ce maximum correspond au couplage optimal entre la thermodiffusion et la convection. La valeur de b conduisant à une séparation maximale augmente quand ΔT augmente, en effet lorsque ΔT augmente pour H fixée, la thermodiffusion augmente donc il faut augmenter la convection c'est-à-dire b pour conserver un couplage optimal.

Il ressort de la figure 1 que pour obtenir de fortes séparations, il faut recourir à des gradients élevés de température tout en gardant à l'esprit que les résultats ont été obtenus dans le cadre de l'approximation de Boussinesq (faible différence de température imposée au fluide).

Notons aussi que le problème algébrique du troisième degré considéré admet trois valeurs réelles différentes pour la séparation pour certaines valeurs du gradient horizontal de température b . L'étude de stabilité menée analytiquement a montré que les trois solutions obtenues sont toutes linéairement stables.

5. Comparaison des résultats analytiques et numériques

Dans ce paragraphe on présente les résultats analytiques et numériques pour une cellule de 2 mm d'épaisseur et de 200 mm de longueur, avec une différence de température de 1K entre les deux parois horizontales, pour différentes valeurs du gradient horizontal de température b .

Pour la simulation numérique on a utilisé le code éléments finis de calcul industriel FEMLAB. On a choisi des maillages en quadrangles mieux adaptés pour la forme rectangulaire de la cellule utilisée.

La figure 2 montre les résultats de séparation obtenus analytiquement et numériquement pour ce rapport d'aspect de 100. On trouve que les résultats numériques sont en bon accord avec les résultats analytiques.

Pour la valeur 45 K m^{-1} du gradient horizontal de température on a obtenu 3 solutions analytiques pour la séparation : $S_1=0.011672$, $S_2=0.026754$ et $S_3=0.028315$. L'étude numérique a confirmé la stabilité linéaire des trois différentes solutions et a montré que la solution associée à S_1 était beaucoup plus attractive que les deux autres, une situation similaire a été observée par Mahidjiba et al [7].

La figure 3 montre la variation du champ de concentration en fonction du gradient horizontal de température b , pour une cellule de dimensions 2mm x 20mm soit un rapport d'aspect de 10, et pour $\Delta T=1\text{K}$. Les lignes représentent les isoconcentrations.

Pour un faible gradient de température ($b=10, 20 \text{ K m}^{-1}$) on observe que les isoconcentrations sont presque horizontales ce qui montre que la séparation est due principalement à la thermodiffusion. En augmentant le gradient horizontal de température b on accroît la vitesse convective et on s'approche de plus en plus d'une séparation selon l'horizontale (40 K/m). Quand b augmente encore la convection devient très importante devant la thermodiffusion, la courbure des isoconcentrations augmente et la séparation diminue.

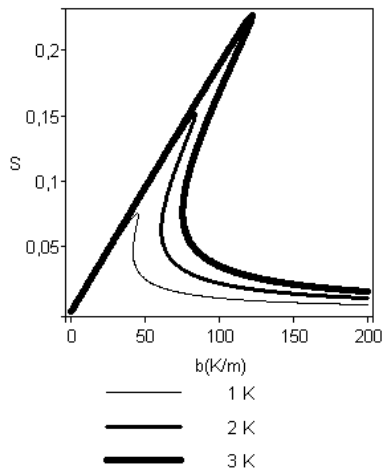


Figure 1 Variation de la séparation en fonction de b (K/m) pour différentes valeurs de ΔT (K), pour $H=2\text{mm}$ et pour $L=530\text{mm}$.

Fig. 1. Variation of the separation with respect to b (K/m) for various values of ΔT (K) for $H=2\text{mm}$ and for $L=530\text{mm}$.

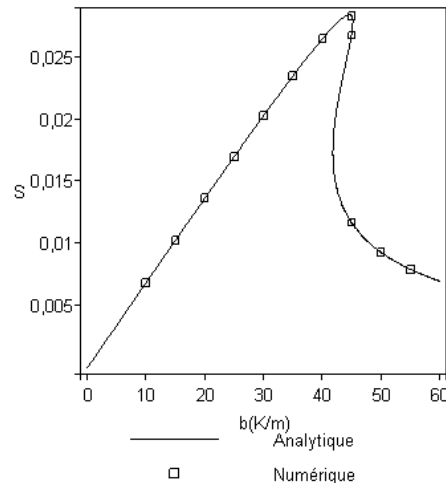


Figure 2 Résultats analytiques et numériques ($H=2\text{mm}$, $L=200\text{mm}$, $\Delta T=1\text{K}$).

Fig. 2 Analytical and numerical results ($H=2\text{mm}$, $L=200\text{mm}$, $\Delta T=1\text{K}$).

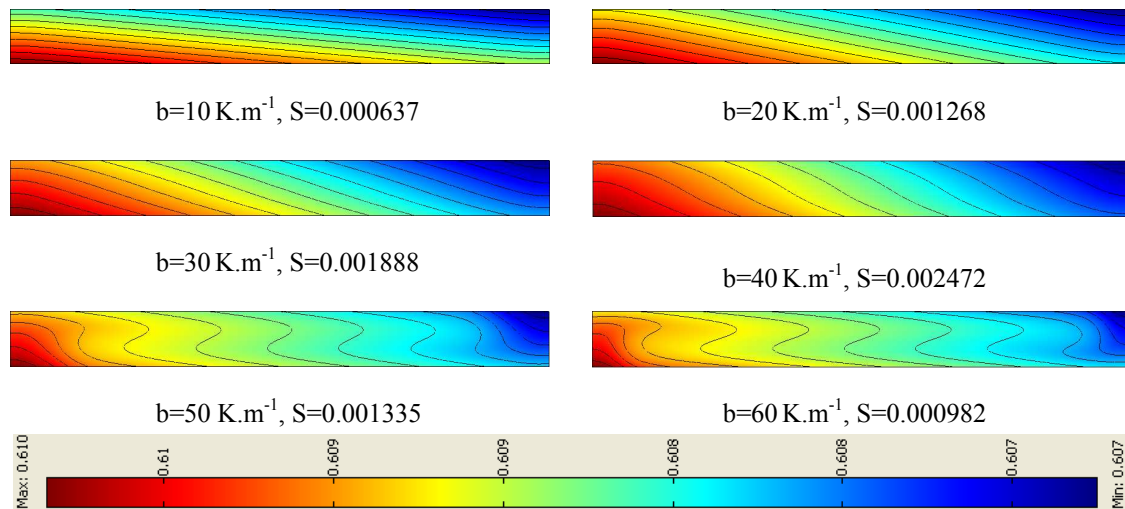


Figure 3 Variation du champ de concentration en fonction du gradient horizontal de température b . ($H=2\text{mm}$, $L=20\text{mm}$, $\Delta T=1\text{K}$). Les couleurs traduisent l'intensité de la fraction massique de l'eau.

Fig. 3. Concentration field Variation with respect to the horizontal temperature gradient b . ($H=2\text{mm}$, $L=20\text{mm}$, $\Delta T=1\text{K}$). The colours indicate the intensity of the mass fraction of water.

6. Conclusion

Nous avons proposé une nouvelle procédure pour la séparation des espèces d'un mélange binaire. Cette procédure diffère de toutes celles utilisées précédemment. Ici on utilise une cellule horizontale avec des gradients horizontaux de température imposés sur les deux parois horizontales. Pour cette approche on dispose de deux paramètres de contrôle extérieurs indépendants à savoir le gradient de température constant imposé aux plaques horizontales et la différence de température ΔT entre la paroi chaude du haut et la paroi froide du bas, alors que pour la cellule verticale, on dispose uniquement de la différence de température entre les deux plaques verticales.

On a pu obtenir des séparations appréciables (de l'ordre de 10%) pour des valeurs raisonnables de l'épaisseur (de l'ordre de 2mm) et pour des longueurs de l'ordre de 500mm, ce qui présente un avantage par rapport à la cellule verticale qui nécessite des épaisseurs très faibles (de l'ordre de 0.2mm) pour avoir des séparations du même ordre de grandeur.

Références

- [1] S. R. De Groot et P. Mazur, Non-equilibrium thermodynamics (New York: Dover 1984).
- [2] W. H. Furry, R. C. Jones et L. Onsager, On the theory of isotope separation by thermal diffusion, Physical Review 55 (1939) 1083-1095.
- [3] A. H. Emery et M. Lorenz, Thermal diffusion in packed column; A. I. Ch. E. J. 9 (1963) 661-663.
- [4] P. Jamet, D. Fargue, P. Costesèque, A. Cernes, The thermogravitational effect in porous media: a modeling approach, Transport Porous Med. 9 (1992) 223-240.
- [5] M. Marcoux, et M. C. Charrier Mojtabi. Etude paramétrique de la thermogravitation en milieu poreux. C.R. Acad. Sci. Paris série IIb, 326, (1998), 539-546.
- [6] J. K. Platten., M. M. Bou-ali, and J. F. Dutrieux, Enhanced molecular separation in inclined thermogravitational columns, J. Phys. Chem. B, vol. 107, (2003) 11763-11767.
- [7] A. Mahidjiba, R. Bennacer, P. Vasseur, Flows in a fluid layer induced by the combined action of a shear stress and the Soret effect, Int. J. Heat Mass Transfer, 49, (2006) 1403-1411.